

$$+ \left. \frac{J_{-31} J_{14}}{J_{01} J_{14}} + \frac{J_{-13} J_{12} J_{21}}{J_{01} J_{02} J_{03}} + \frac{J_{-11} J_{-12} J_{14}}{J_{01} J_{02} J_{04}} + \dots \right)^2. \quad (3)$$

Видно, что в данном случае интенсивности света, дифрагировавшего в $+1$ и -1 -й порядки, не равны $I_1 \neq I_{-1}$. То же наблюдается и в более высоких порядках.

Для примера рассмотрим дифракционную эффективность решетки с «пилообразным» профилем (см. рис. 1, б). В [2] также указывалось, что для такой решетки должна быть асимметрия в дифракции. Используя разложение «пилообразной» функции в ряд Фурье по синусам, получаем пропускание голограммы в виде $t = \prod_{k=1}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \exp(i2\pi \xi m k x) J_m$

$\left(\frac{(-1)^{k+1}}{k} \varphi \right)$. Дифракционная эффективность $+1$ и -1 -го порядков, рассчитанная по формулам (2) и (3), представлена на рис. 2, б. Максимальная эффективность $+1$ -го порядка (кривая 1) составляет $\sim 53\%$. В -1 -й порядок дифрагирует не более 8% падающего излучения (кривая 2).

Несмотря на то, что доля энергии электромагнитной волны, дифрагировавшей в $+1$ -й порядок, значительно выше, чем в случае косинусоидальной голограммы, максимальная суммарная эффективность $+1$ и -1 -го порядков в данном случае ниже, чем для голограммы с косинусоидальным профилем штриха.

Таким образом, в результате показано, что дифракционная эффективность голограмм с симметричным профилем штриха не может превышать эффективности косинусоидальной голограммы, которая составляет $\sim 33,9\%$. Если профиль штриха несимметричен, то асимметрия наблюдается и в дифракции $I_1 \neq I_{-1}$. Причем дифракционная эффективность первого порядка (η_1 или η_{-1}) может значительно превышать эффективность косинусоидальной голограммы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кольер Р., Беркхарт К., Линн Л. Оптическая голография.— М., 1973.
2. Озолс А. О.— Опт. и спектр., 1977, т. 42, № 1, с. 168.
3. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции.— М., 1966.

Поступила в редакцию
02.11.84.

УДК 535.37

АЛЬ-МУТАВАЛЛИ МААД САБРИ, С. К. ГОРБАЦЕВИЧ

СТОХАСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ РАСТВОРОВ СЛОЖНЫХ МОЛЕКУЛ

В лазерах на красителях широко используются растворители, представляющие смесь полярной и неполярной жидкости. В этой связи представляет интерес исследование проявлений универсальных межмолекулярных взаимодействий в спектрах сложных молекул в двухкомпонентных растворителях.

В ряде работ [1—8] показано, что небольшая добавка полярной жидкости, слабо изменяющая диэлектрическую проницаемость смешанного растворителя, вызывает существенные сдвиги спектров поглощения и флуоресценции молекул растворенного вещества. Это обусловлено тем, что в силу диполь-дипольных ориентационных взаимодействий вблизи молекулы активатора локальная концентрация полярной компоненты значительно больше, чем средняя по объему растворителя [7—11].

Для количественного описания зависимости положения спектра и его

координационную сферу вокруг молекулы активатора. Предположим, что трансляционная релаксация молекул растворителя, т. е. замены полярных молекул на неполярные и наоборот, происходит значительно медленнее, чем перестройки молекул растворителя в пределах координационной сферы.

Всем полярным молекулам растворителя, входящим в ячейку, присваивались номера от 1 до j ($j=1, 2, \dots, N$), затем генерировалось целое случайное число от 1 до j . Выбранная таким образом молекула поворачивалась на некоторый угол $\gamma=A\eta$ и смещалась в произвольном направлении на некоторую величину $S=B\beta$ таким образом, чтобы ее расстояние от молекулы активатора не изменилось, т. е. смещение производилось по поверхности некоторой сферы радиуса $R=R+r$. При этом не допускалось проникновение молекул растворителя друг в друга (молекулы моделировались твердыми сферами). Здесь η и β — случайные числа, равномерно распределенные на отрезке $[-1, 1]$; A и B — максимальные значения величин γ и S (от выбора A и B решение не зависит, их величина сказывается только на скорости схождения процедуры). Далее вычислялась полная потенциальная энергия системы с новой конфигурацией, получившейся после поворота системы:

$$W = \sum_{i=1}^{j-1} \sum_{k>i} V_{ik}, \quad (2)$$

где V_{ik} — энергия диполь-дипольного взаимодействия молекул i и k .

Если приращение энергии ΔW в результате поворота и смещения молекулы оказывалось отрицательным, смещение «принималось», и данная молекула оставалась в новом положении. Если величина ΔW положительная, то смещение принималось с вероятностью $\exp(-\Delta W/KT)$. Независимо от результата, т. е. от того, было принято смещение или нет, считалось, что в цепи Маркова имел место один шаг.

Описанная процедура повторялась до тех пор, пока система не достигала равновесного состояния. В построенном таким образом «равновесном» ансамбле одна из конфигураций принималась за начальную, и процедура, описанная выше, повторялась многократно, но на данном этапе на каждом шагу Марковской цепи вычислялись значения энергии $-U_j$ взаимодействия полярной молекулы растворителя со всей системой (активатор и все молекулы растворителя), а также энергия E_j взаимодействия активатора с полярными молекулами растворителя, образующими координационную сферу (это взаимодействие определяет сдвиг спектров поглощения и испускания активатора при переходе от неполярного растворителя к бинарному). В результате вычислялись средние значения $\langle U_j \rangle$ и $\langle E_j \rangle$. Значения $\langle U_j \rangle$ использовались при решении системы уравнений (1), в результате находились величины X_j , по которым рассчитывалось среднее значение числа полярных молекул в координационной сфере

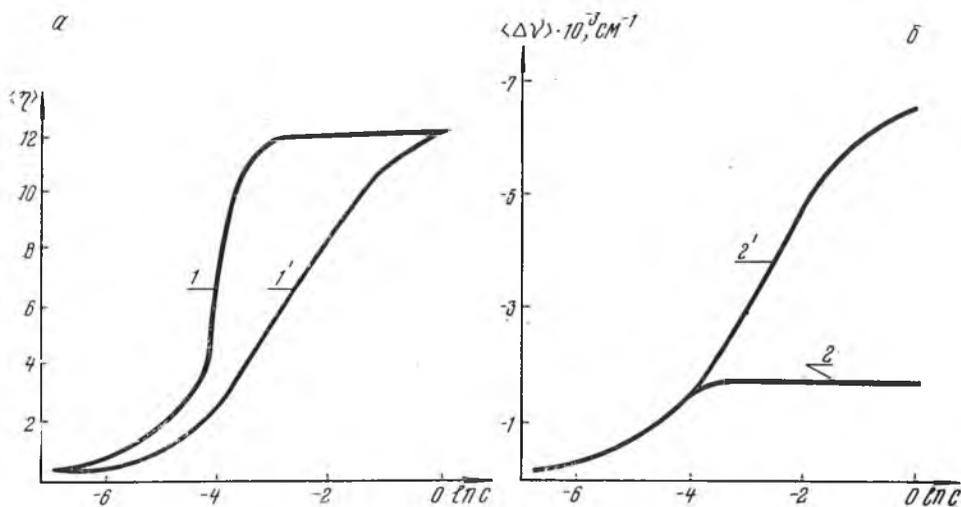
$$\langle n \rangle = \frac{\sum_{j=0}^N j X_j}{\sum_{j=0}^N X_j}, \quad (3)$$

а также сдвиг спектра поглощения (испускания) молекулы активатора

$$\Delta \nu_{a(j)} = \frac{\sum_{j=0}^N X_j \langle E_j \rangle \left(\pm \frac{\mu_e}{\mu_g} \cos \varphi \pm 1 \right)}{\sum_{j=0}^N X_j}. \quad (4)$$

Здесь $\vec{\mu}_g$ и $\vec{\mu}_e$ — дипольные моменты молекулы активатора в основном

и возбужденном состоянии соответственно; φ — угол между этими векторами.



Расчетные зависимости среднего числа полярных молекул в координационной сфере (а) и среднего сдвига спектра трехкомпонентного раствора (б) от логарифма мольной доли полярного компонента смешанного растворителя:

$$\mu_g = 2,5; \mu = 2,5D; T = 300K; R = r = 2\text{\AA}, N = 12$$

На рисунке приведены зависимости $\langle n \rangle$ и $\Delta \nu$ от логарифма концентрации полярной добавки, рассчитанные в рамках модели, описанной выше (кривые 1, 2), и по теории [11], не учитывающей взаимодействия молекул растворителя между собой (кривые 1', 2'). Видно, что в области низких концентраций имеет место совпадение кривых 1 и 1', 2 и 2'. Это обусловлено тем, что в случае низких концентраций полярной компоненты в координационной сфере присутствуют 1—2 молекулы полярного растворителя, и взаимодействие между ними мало. С повышением концентрации полярного растворителя начинает сказываться взаимодействие полярных молекул растворителя между собой в пределах одной координационной сферы. Это проявляется в снижении эффективности взаимодействия молекул растворителя с активатором, т. е. присоединение каждой следующей молекулы полярного растворителя в координационную сферу приводит к меньшему сдвигу спектра активатора. Кроме того, присоединение полярных молекул растворителя в координационную сферу носит «кооперативный» характер, т. е. замена неполярной молекулы на полярную в ближайшем окружении активатора тем выгоднее, чем больше полярных молекул в координационной сфере. Таким образом, взаимодействие полярных молекул растворителя между собой приводит к более быстрому заполнению координационной сферы полярными молекулами (см. рисунок, а, кривые 1, 1') и к уменьшению сдвига спектра активатора (см. кривые 2, 2').

ЛИТЕРАТУРА

1. Черкасов А. С.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1960, т. 24, № 5, с. 591.
2. Черкасов А. С.— Опт. и спектр., 1962, т. 12, № 1, с. 73.
3. Kamski A., Polacka B., Czyz P.— Acta Phys. Polonica, 1963, т. 23, № 6, с. 706.
4. Веселова Т. В., Лимарева Л. А., Черкасов А. С., Широков В. И.— Опт. и спектр., 1965, т. 19, № 1, с. 78.
5. Зелинский В. В., Обыкновенная И. Е.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1965, т. 29, № 6, с. 962.
6. Викторова Е. Н.— Опт. и спектр., 1967, т. 23, № 2, с. 380.
7. Бахшнев Н. Г., Волков В. П., Алтайская А. В.— Опт. и спектр., 1970, т. 28, с. 51.

8. Алтайская А. В., Бахшиев Н. Г., Питерская И. В.— Опт. и спектр., 1969, с. 27, № 6, с. 1013.
 9. Бахшиев Н. Г., Питерская И. В.— Опт. и спектр., 1976, т. 40, № 2, с. 269.
 10. Бахшиев Н. Г., Алтайская А. В.— Опт. и спектр., 1969, с. 26, № 6, с. 950.
 11. Мазуренко Ю. Т.— Опт. и спектр., 1972, т. 33, № 6, с. 1960.
 12. Горбацевич С. К., Гулис И. М., Комяк А. И.— ЖПС, 1984, т. 40, № 4, с. 583.

Поступила в редакцию
22.01.85.

УДК 530.12; 530.145

Г. В. ШИШКИН, И. Е. АНДРУШКЕВИЧ

РАЗДЕЛЕНИЕ ПЕРЕМЕННЫХ В УРАВНЕНИИ ДИРАКА В ОБЩЕЙ ТЕОРИИ ОТНОСИТЕЛЬНОСТИ. I

Одной из первоочередных задач в рамках проблемы объединения квантовой теории и общей теории относительности (ОТО) является исследование ковариантного обобщения уравнения Дирака (КОУД). Трудности математического характера не позволили развить общего метода для получения его точных решений в ОТО. Зачастую даже и не приходится говорить о точных решениях КОУД, поскольку не удается пройти первый необходимый этап — разделение переменных. Дело в том, что успех такой операции во многом определяется не только объективными (вид метрики пространства — времени), но и субъективными (выбор локального репера, порядок отделения переменных) причинами. Не случайно поэтому, что в наиболее известных в этом отношении работах [1—2] разделение проводится только для конкретных видов метрики и выбора тетрады. При этом не анализируются условия, позволяющие провести разделение переменных в КОУД.

Общие замечания. Принимаем метрику пространства в виде

$$ds^2 = A \cdot (dx^1)^2 + B \cdot (dx^2)^2 + C \cdot (dx^3)^2 - D \cdot (dx^4)^2, \quad (1)$$

где A, B, C, D — произвольные положительно определенные функции переменных x^1, x^2, x^3, x^4 , и используем диагональную калибровку тетрады

$$h_{\mu}^i = \text{diag}(A^{1/2}, B^{1/2}, C^{1/2}, D^{1/2}). \quad (2)$$

Здесь греческие индексы отнесены к ОТО, латинские — к специальной теории относительности (СТО); те и другие пробегают значения от 1 до 4.

Связь γ -матриц Дирака в ОТО (γ) и СТО ($\tilde{\gamma}$) устанавливается соотношениями

$$\gamma_{\mu} = h_{\mu}^i \tilde{\gamma}_i, \quad \gamma^{\mu} = h^{\mu}_i \tilde{\gamma}^i. \quad (3)$$

При этом

$$[\gamma^{\mu}, \gamma^{\nu}]_{+} = 2g^{\mu\nu}I, \quad g^{\mu\nu} = \text{diag}(A^{-1}, B^{-1}, C^{-1}, -D^{-1}). \quad (4)$$

$$[\tilde{\gamma}^m, \tilde{\gamma}^n]_{+} = 2\eta^{mn}I, \quad \eta^{mn} = \text{diag}(1, 1, 1, -1), \quad I = \text{diag}(1, 1, 1, 1). \quad (5)$$

Обращаясь к общепринятому определению спинорной связности [6, 7]

$$4\Gamma_{\lambda} = g_{\mu\alpha} \{ \partial_{\lambda} h_{\nu}^k \cdot h^{\alpha}_k - \Gamma_{\nu\lambda}^{\alpha} \} s^{\mu\nu}, \quad 2s^{\mu\nu} = \gamma^{\mu}\gamma^{\nu} - \gamma^{\nu}\gamma^{\mu}, \\ \partial_{\lambda} = \frac{\partial}{\partial x^{\lambda}}, \quad \Gamma_{\nu\lambda}^{\alpha} = \frac{g^{\alpha\beta}}{2} \left\{ \frac{\partial g_{\beta\nu}}{\partial x^{\lambda}} + \frac{\partial g_{\lambda\beta}}{\partial x^{\nu}} + \frac{\partial g_{\nu\lambda}}{\partial x^{\beta}} \right\}, \quad (6)$$

в нашем случае получаем

$$4\Gamma_1 = -(\partial_2 A \cdot \gamma^1 \gamma^2 + \partial_3 A \cdot \gamma^1 \gamma^3 + \partial_4 A \cdot \gamma^1 \gamma^4), \quad 4\Gamma_2 = -(\partial_1 B \cdot \tilde{\gamma}^2 \tilde{\gamma}^1 + \\ + \partial_3 B \cdot \tilde{\gamma}^2 \tilde{\gamma}^3 + \partial_4 B \cdot \tilde{\gamma}^2 \tilde{\gamma}^4), \\ 4\Gamma_3 = -(\partial_1 C \cdot \tilde{\gamma}^3 \tilde{\gamma}^1 + \partial_2 C \cdot \tilde{\gamma}^3 \tilde{\gamma}^2 + \partial_4 C \cdot \tilde{\gamma}^3 \tilde{\gamma}^4), \quad 4\Gamma_4 = \partial_1 D \cdot \tilde{\gamma}^4 \tilde{\gamma}^1 + \quad (7)$$